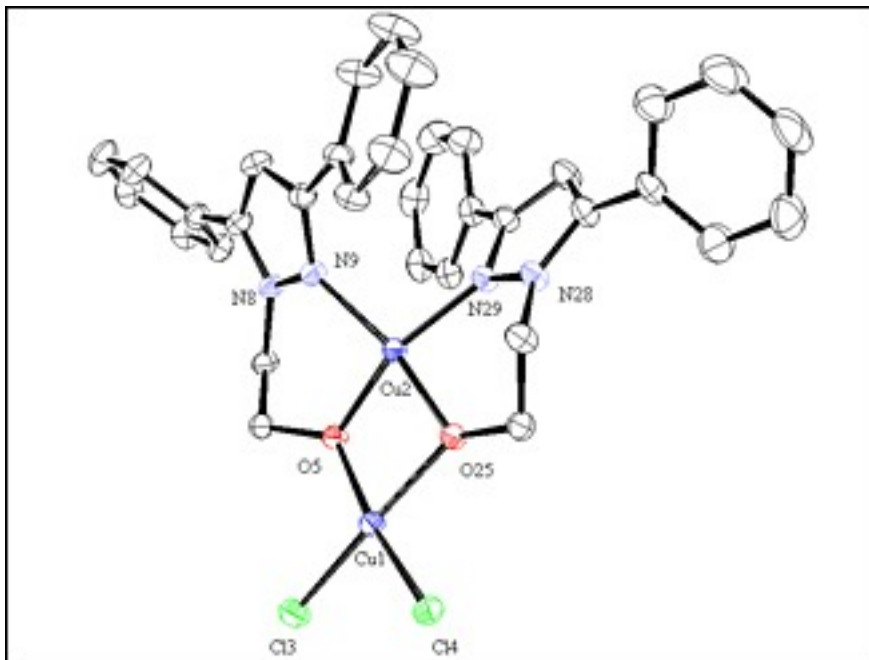


La química dels nostres fàrmacs

09/2011 - **Química.** Les estructures anomenades en química lligands híbrids són aquelles que estan formades per dos o més àtoms del tipus donador (com el nitrogen, l'oxigen, el sofre, el fòsfor, etc) que es combinen (es lliguen) amb els metalls. Un d'aquests lligands híbrids és l'N-pirazole que trobem en alguns productes farmacèutics de gran importància. Investigadors de la Unitat de Química Inorgànica de la UAB han caracteritzat i han descrit la síntesi d'un tipus de lligand N-pirazole anomenat "L" que presenta gran versatilitat segons el metall a què s'uneixi.



Esquema del complex $[CuCl(L)]_2$ (L = 2-(3,5-difenil-1H-pirazol-1-il)etanol)

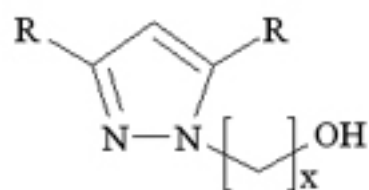
La investigació en química de coordinació ha progressat molt durant les últimes dècades. En particular, els compostos que contenen com a lligands, lligands híbrids, presenten una gran varietat d'aplicacions. S'entén per lligands híbrids aquells que contenen en la seva estructura dos o més àtoms donadors (N, S, O, P, etc), els quals coordinen els metalls amb més o menys força.

En particular, la coordinació de lligands N-pirazole ha estat àmpliament estudiada, ja que tenen aplicacions en camps molt diferents com, farmacèutics, catàlisi, magnètics entre d'altres. Aquests estudis han estat àmpliament descrits en la literatura. En els últims 10 anys, el nostre grup de recerca ha centrat el seu interès en la síntesi i caracterització de lligands N-pirazole 1,3,5-trisubstituïts i hem estudiat la seva coordinació a diferents metalls de transició. Una de les nostres línies de recerca és la síntesi i caracterització de lligands que contenen grups H, -CH₃, -CF₃, fenil o piridina en les posicions 3 i/o 5, i cadenes hidroxialquil (-CH₂)_n-OH en la posició 1 de l'anell de pirazole.

En aquest article es presenta la síntesi i caracterització del lligand 2-(3,5-difenil-1H-pirazol-1-il)etanol (L) així com la seva reactivitat enfront els metalls de transició pal·ladi, zinc i coure (Pd(II), Zn(II) i Cu(II)).

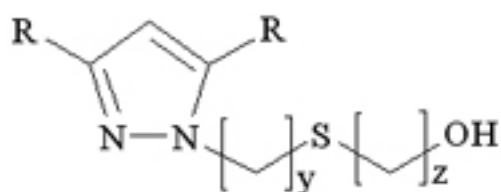
La síntesi del lligand (L) es duu a terme en una sola etapa i amb un 96% de rendiment. Una vegada sintetitzats els compostos de Pd(II), Zn(II) i Cu(II), s'han caracteritzat mitjançant anàlisi elemental (C, H, N), espectrometria de masses, mesures de conductivitat, espectroscopia d'IR i RMN monodimensional i bidimensional, i també per difracció de raig-X en monocristall. Pel complex de Cu(II) també s'han fet estudis magnètics i de ressonància d'espín electrònic (EPR). Els compostos de Pd(II) i Zn(II) són mononuclears mentre que el de Cu(II) és dinuclear.

En aquest treball es demostra la gran versatilitat de coordinació d'aquest lligand (L) segons sigui el metall a què es coordina.



$R = H, CH_3, CF_3, \text{pyridine, phenyl}$

$x = 1, 2, 3$



$R = CH_3$

$y, z = 2$

$y = 2, z = 3$

Lligands N-pirazole, O-pirazole desenvolupats prèviament en el grup d'investigació de la UAB.

Josefina Pons

Departament de Química

Unitat de Química Inorgànica

"Study of the coordination behaviour of (3,5-diphenyl-1H-pyrazol-1-yl)ethanol against Pd(II), Zn(II) and Cu(II)". Sergio Muñoz, Josefina Pons, Josep Ros, Mercè Font-Bardía, Colin A. Kilner, Malcolm A. Halcrow. *Inorganica Chimica Acta* 373 (2011) 211-218.